

Рис. 3.
Расчетное и экспериментальное строение комплекса цинка и его люминесценция

чески перспективных соединений. Перебрав целый ряд органических лигандов, нам удалось рассчитать, какой из лигандов обеспечивает максимальный зазор между граничными молекулярными орбиталями — HOMO и LUMO, — энергетический переход между которыми и определяет длину волны люминесценции. Именно это соединение и было предложено для синтеза, и первые же эксперименты на выращенном для него монокристалле показали прекрасное согласование экспериментальной структуры комплекса с рассчитанной (рис. 3).

Но этого мало: комплекс обладает рекордной в своем классе синей люминесценцией — с длиной волны 423 нм! Пленки, полученные на его основе, демонстрируют яркое синее свечение, что в итоге позволило создать на их основе синий светодиод.

Вот так был полностью пройден путь от квантово-химических расчетов до реального устройства с рекордно синей люминесценцией.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Granovsky Alex A. Firefly version 7.1.G* – [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)

Программное обеспечение для моделирования на суперкомпьютерах высокотемпературной импульсной плазмы



23 Программное обеспечение для моделирования на суперкомпьютерах высокотемпературной импульсной плазмы

Управляемый термоядерный синтез и плазменные технологии, физические процессы в космосе и источники мощных ионизирующих излучений — эти и многие другие разделы физики и техники развиваются на основе исследований импульсной плазмы с высокой плотностью энергии. Для сопровождения экспериментов с плазмой, обладающей экстремально высокими значениями температуры или плотности (оптимизация, прогноз, анализ данных) необходимо создавать коды, ориентированные на высокопроизводительные параллельные и распределенные вычисления.

Наиболее известными источниками импульсной (короткоживущей) плазмы в лабораторных условиях являются мощные лазеры и электрофизические установки. В данной статье речь пойдет о проблеме моделирования плазмы мощных электрических разрядов. Современные генераторы электроимпульсов позволяют создавать электрические разряды, в которых ток достигает значений в миллионы и даже в десятки миллионов ампер. Этот процесс используется как для создания плотной «горячей» плазмы, так и для генерации импульсных магнитных полей, действие которых на проводящие среды эквивалентно давлению в десятки миллионов атмосфер. Электродинамическое сжатие вещества в сильноточном разряде (пинче) происходит за время масштаба ста наносекунд и менее, а финальная температура измеряется миллионами градусов. Плазма «быстрых пинчей» — ценный объект фундаментальных исследований вещества в экстремальных состояниях, результаты которых применяются в развитии проектов управляемого термоядерного синтеза (УТС), новых технологий микро- и наноуровня, в лабораторных исследованиях экстремальных состояний вещества, соответствующих астрофизическим процессам, и т.д. [1].

Состояние высокотемпературной плазмы подвержено всевозможным тепловым и гидродинамическим неустойчивостям, приводящим к турбулентному состоянию течения. В статье [2] отмечалось, что суперкомпьютеры открывают возможность выполнения трехмерного моделирования пинчей и детализации их структуры на микронных масштабах — при характерном размере пинча в несколько сантиметров, в силу чего потребуются расчетные сетки размером от сотен миллионов до миллиарда ячеек. Высокопроизводительные компьютеры сделают реалистичными прогнозирующие расчеты для экспериментов на будущих электрогенераторах с уровнем мощности 1000 ТВт, которые позволят, например, непосредственно приступить к лабораторным исследованиям УТС на основе «инерционного» удержания плазмы [1, 2].

Эксперименты с пинчами анализируются и оптимизируются в основном методом компьютерного моделирования. Создание универсальных «прогнозирующих» кодов — это важнейшая современная проблема в данной области вычислительной физики. На пути создания программного обеспечения (ПО) в научных целях необходимо учесть ряд общих требований. Темпы исследований в физике плазмы, как и во многих других отраслях науки, таковы, что экспериментальные проекты постоянно и в большом числе возникают, развиваются и трансформируются в новые схемы экспериментов. Поэтому для сопровождения экспериментов необходимо создание «оперативного» ПО, которое может быть быстро адаптировано к изменившимся условиям и содержит средства,

АВТОРЫ:

В.А. Гасилов — докт. физ.-мат. наук, профессор, зав. отделом, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН;
e-mail: vgasilov@yandex.ru

А.С. Болдарев — зав. сектором ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, к.ф.-м.н., доцент;
e-mail: boldar@imamod.ru

С.В. Дьяченко — научный сотрудник ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, к.ф.-м.н.;
e-mail: dyachenko.sergey@gmail.com

упрощающие работу с комплексными физико-математическими моделями, алгоритмами и данными различной структуры. Область применения «параллельного» кода должна быть широкой, чтобы сделать его востребованным для многих исследователей и, тем самым, оправдать затраты на его создание. Поэтому качество современного ПО для научных исследований должно быть на уровне «индустриальных» кодов, также как и поддержка труда пользователей, и сопровождение программ. Перечисленные требования заставляют обратить особое внимание на архитектуру кода и технологии программирования.

Проект разработки кода для моделирования пинчей, соответствующего перечисленным требованиям, стартовал около шести лет назад в ИММ РАН и продолжается в настоящее время в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (проект MARPLE) [3].

Код MARPLE — это совокупность солверов систем уравнений базовых физико-математических моделей и вычислительной среды (инфраструктуры) для проведения параллельных расчетов прикладных начально-краевых задач. Основу кода составляет модель динамики плазмы как диссипативной среды, в которой существенны процессы теплопроводности, обмена энергией между компонентами (ионами и электронами) и лучистый энергоперенос. Уравнения модели аппроксимируются на неструктурированных расчетных сетках, строящихся из элементов различных типов — тетраэдров, гексаэдров или призм. Такой подход обеспечивает возможность вычислений для расчетных областей нетривиальной геометрии. Для разработки солверов MARPLE применены консервативные интегро-интерполяционные схемы высокого порядка аппроксимации.

Вычислительное ядро кода, а также средства пред- и постобработки данных, работают в общей вычислительной среде с развитой инфраструктурой и адаптированной к параллельным вычислениям унифицированной системой данных, аналогичной применяемым в индустриальных «конечно-элементных» кодах.

Основные идеи, заложенные при создании MARPLE, как абстрактной вычислительной среды, так и солверных компонентов, это:

- реализация большого числа сервисных функций (ввод-вывод данных, операции с расчетными сетками, поддержка параллельных вычислений, динамическая работа с вычислительными объектами) на уровне вычислительной среды, что позволяет создавать физические солверы с минимальными затратами ресурсов и обеспечивает унификацию их интерфейсов;
- автоматическое управление динамическим созданием и уничтожением вычислительных объектов разных типов, таких как солверы уров-

ней вычислительного домена, физической подобласти и элементарные солверы, аппроксимации, граничные условия, а также настройка их параметров.

Использование объектно-ориентированного подхода к проектированию ПО, приемов объектного и обобщенного программирования (язык реализации — Си++), системы контроля версий исходного кода (Subversion), интегрированной системы управления разработкой программного обеспечения (Trac), стандартов кодирования (Си++) и документирования (Doxygen) позволяет осуществлять операции различных этапов жизненного цикла программного обеспечения в соответствии с современными мировыми стандартами разработки программного обеспечения.

Переносимость кода обеспечивается за счет следования стандарту языка Си++ 2003 г. Используется специальная кросс-платформенная система сборки кода (CMake). При вводе-выводе данных также применяются переносимые форматы. Для проверки трансляции и сборки исходного кода используются различные компиляторы и среды программирования. Основным целевым транслятором является широко распространенный на различных платформах GNU C++ Compiler.

Посредством кода MARPLE выполняются исследования импульсной плазмы в электрофизических экспериментах, обеспечивающих не только классическое «цилиндрическое» сжатие плазмы (конфигурация типа «пинч»), но и квазитрехмерное сжатие, которое ведет к более высоким концентрациям вещества и энергии. Рисунки к статье демонстрируют приложение новых типов пинчей к моделированию процесса «выброса» плазменной струи, активно изучаемого в настоящее время в астрофизике.

План развития кода предусматривает включение в него новых моделей импульсной плазмы (например, создаваемой лазерами), а также оптимизацию процессов вычислений и обработки данных. В перспективе предусматривается подготовка кода к использованию на вычислительных системах сверхвысокой производительности, уровня сотен терафлоп и выше, которые в предстоящее десятилетие будут внедряться в научные исследования.

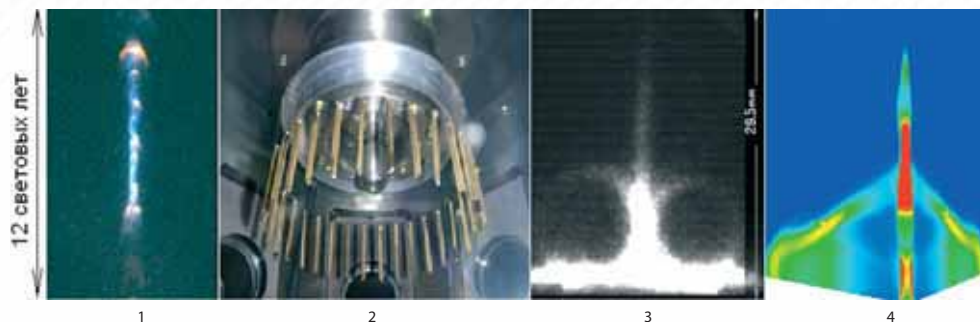


Рис. 1.

Лабораторная астрофизика.

1 – Расширяющийся газовый пузырь от двойной звездной системы HH111 (фотография получена на Космическом телескопе имени Хаббла, Бо Рейпурт, NASA).

2 – Радиальная проволочная сборка на установке OEDIPE (Грама, Франция).

3 – Эксперимент на электрофизической установке OEDIPE (физическое моделирование «плазменного джета» из двойной системы звезд с помощью сжатия проволочной сборки).

4 – Трехмерный расчет MARPLE (распределение плотности плазмы в «джете»)

Работа поддержана Отделением математических наук РАН (проект 3 ОМН), Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 09 01 12109 офи_м, 09 02 01532 а, 10 02 00063 а, 10 02 00449 а), а также исследовательским центром г. Грама (Франция) при активном участии его сотрудников из группы экспериментального комплекса SPHINX. Расчеты выполнены на компьютерах СКИФ МГУ и МВС 100К МСЦ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Frontiers in High Energy Density Physics* / Ed. by D. Henderson – Washington, National Research Council, Nat. Acad. Press, 2003.
2. *Четверушкин Б.Н., Гасилов В.А., Грабовский Е.В.* Суперкомпьютеры и исследования сильноточных импульсных электрических разрядов // Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности / Под ред. акад. В.А. Садовниченко, акад. Г.И. Савина, чл.-корр. РАН Вл.В. Воеводина. М.: Изд-во Моск. ун-та, 2009.
3. *Gasilov V., Dyachenko S., Olkhovskaya O., Boldarev A., Kartasheva E., Boldyrev S.* Object-Oriented Programming and Parallel Computing in Radiative Magnetohydrodynamics Simulations // IOS Press: Advances in Parallel Computing. 2008. Vol. 15.

Исследование фазового поведения мультиматериалов

